Agilent MSD Productivity ChemStation (GC およびGC/MSD システム用)

カタログ

Agilent MSD Productivity ChemStation は GC/MS (ガスクロマトグラフ/質量分析計) 用の 32 ビット統合型ソフトウェアアプリケーションであり、GC/MS のデータ取り込み、データ解析、レポートに伴うすべてのタスクを実行するための全機能が含まれています。MSD Productivity ChemStation ソフトウェアは Windows XP® に対応し、複数の GC/MS や GC で以下の機能をコントロールします。

- GC、MSD、オートサンプラ (ALS)、およびヘッドスペースサンプラ (HSS) の統合的な機器コントロール機能
- GC、GC/MS データ解析機能
- 統合型オートメーション機能
- eMethod 機能
- AutoSIM および SIM/Scan データの同時取り込み機能
- カスタムレポート機能
- マクロプログラミング機能
- ユーザー定義のセキュリティ機能
- ソフトウエアバリデーションツール

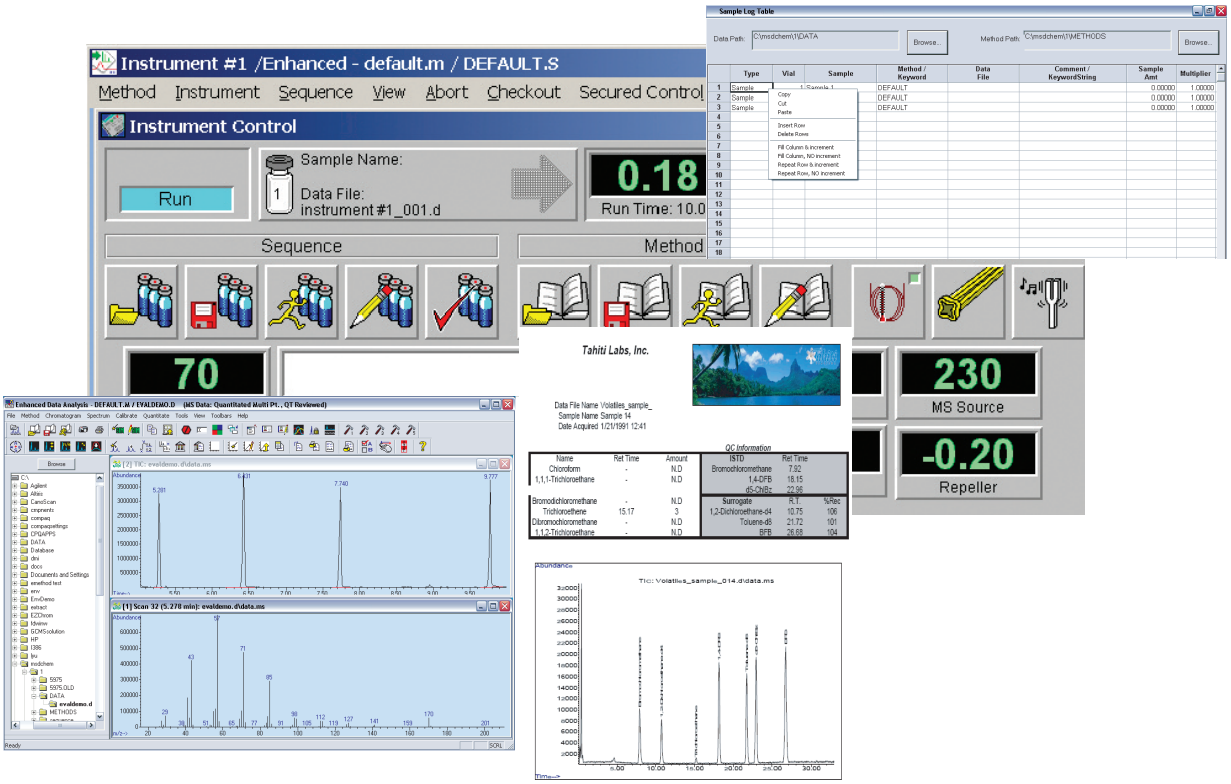


図1　MSD Productivity ChemStation によってアプリケーションを 1 つに統合。さまざまな目的における必要事項に沿うように、サンプル導入から最終レポートまでをシームレスに操作します。

Agilent Technologies

複数の装置を、複数のユーザーにより操作

MSD ケミステーションソフトウェアでは、最大で4 台の機器 (MSD は最大で 2 台) をサポートするように設定できます。また、複数のユーザーがいるラボに適合するように、監督者やユーザーの能力レベルをカスタマイズできます。各メソッドは、メソッドが変更されないように保護できます。

統合型オートメーション機能

本ソフトウェアは、オートメーションおよび高い生産性での操作を目的として設計されています。ラボ情報管理システム (LIMS) のサンプルリストをインポート(読み込み) して、オートサンプラシーケンスを作成できます。自動化作業を分析前と分析後に行うことで、データの評価およびレビューが簡素化されます。作成したカスタムレポートは、メソッドとの統合、およびLIMS システムへのアップロードが可能です。また、上級者ユーザーはマクロ言語を使用して、プロセスの自動化、メニュー選択範囲の変更などをカスタマイズできます。

eMethod

eMethod とは "electronic method" の略称であり、アプリケーションソリューションのパッケージを Agilent から簡単かつ速やかに取得したり、お使いの個人アプリケーションの共有や配布をしたりするためのツールです。

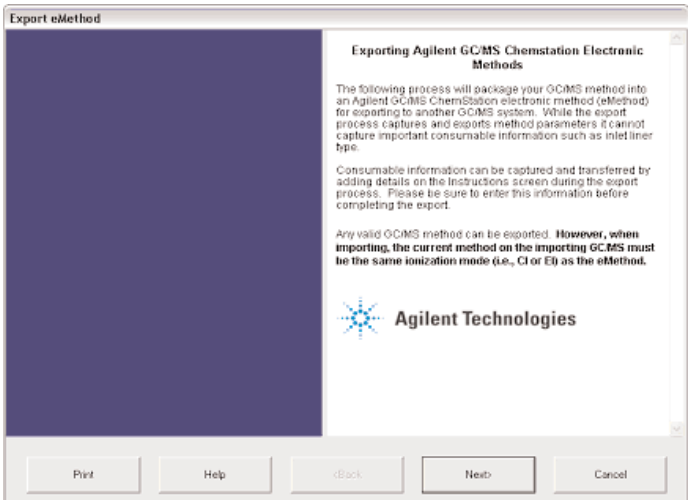


図2.　eMethod プロセスはラボの生産性を大幅に向上させます

eMethod を使用すると、Agilent 5973 series MSD と5975 inert MSD 間で、メソッドを簡単にパッケージ化して転送できます。また、新しいバージョンのAgilent eMethod を Agilent のホームページからダウンロードし、お使いのAgilent 5975 inert MSD または 5973 series MSD にインポートすることにより、手作業でのメソッド編集にともなうエラーなしに新しいメソッド全体を入手することができます。

自動化された選択イオンモニタリング (AutoSIM) のセットアップ

複雑なSIM メソッドは、手動によるセットアップが行いにくいものです。リテンションタイム (RT) およびイオンは、各化合物に対して入力しなければなりません。AutoSIM セットアップ機能を使用すると、注入した標準試料の RT、選択イオン、および同定比率から SIM メソッドを作成する作業プロセスを簡単に実行できます(図4)。

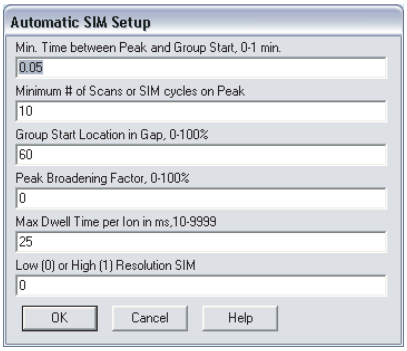


図4.　AutoSIM 設定は任意のフルスキャンメソッドから自動的に SIM メソッドを作成します

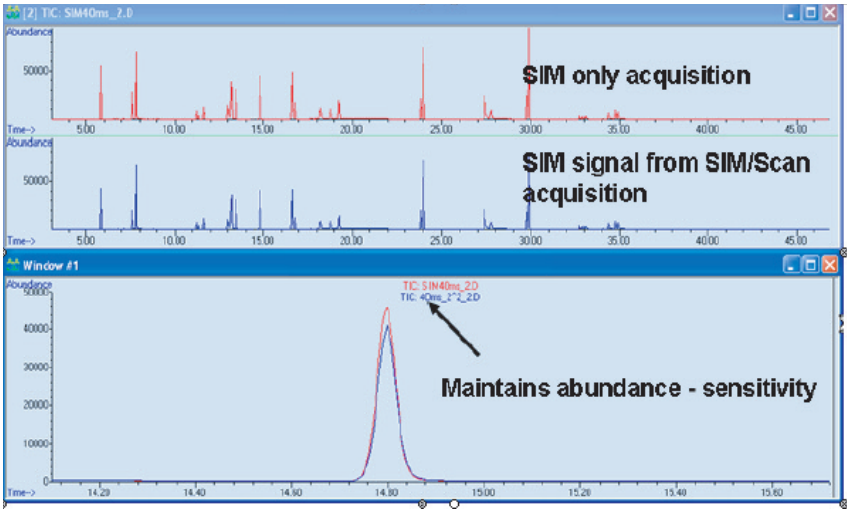


図4.　AutoSIM 設定は任意のフルスキャンメソッドから自動的に SIM メソッドを作成します

SIM/Scan データ同時取り込み

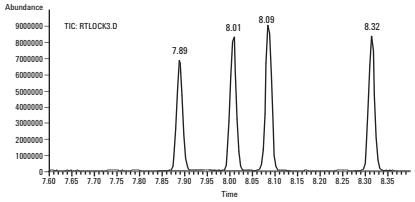
SIM/Scan データ同時取り込みとは、選択イオンモニタリング (SIM) データとフルスキャンデータの両方を 1 回の分析で収集できるモードです(図3)。

この Agilent SIM/Scan データ同時取り込みモードを使用すると、1 回のサンプル注入から SIM データとフルスキャンデータの両方が最適に取り込まれれ、生産性が向上します。

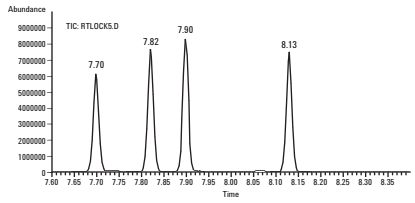
リテンションタイムロッキング（RTL）

リテンションタイムロッキング（RTL）メソッドによって、RT が一定の値に保たれます。これにより、メンテナンス後やメソッドを別の機器に転送する際にメソッド RT を編集する必要がなくなります。注入口の圧力を調整することにより、あるシステム上の RT を別のシステムでの RT に近似させることができます。下図に、カラムが変更された際に RTL によって RT 変動が抑えられていることを示します。

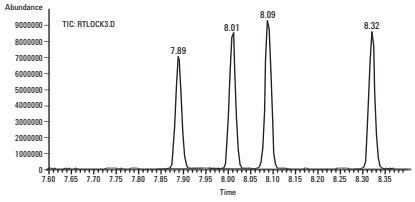
カラム切除前



カラム先端を切除



RTL によるロック後



結果スクリーナー

リテンションタイムがロックされたデータ取り込みでは、個々のピークをスペクトルライブラリに対してひとつひとつ検索しないでも、データベースに含まれる数多くの化合物をスクリーニングできます。RT とスペクトル特性の両方が使用されるため、より確実な同定が可能です。

キャリブレーションテーブルの自動セットアップ (AutoQuant セットアップ)

化合物標準試料を注入してから Auto-Quant セットアップを使用すると、ソフトウェア操作についての知識をそれほど必要とせずに GC/MS のキャリブレーションテーブルを速やかにセットアップできます (図5)。

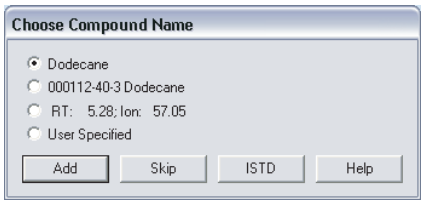


図5. AutoQuant セットアップを使用して GC/MS キャリブレーションテーブルを簡単に設定できます。

薬物試験モードのインテリジェントシーケンス

乱用薬物試験では、キャリブレーション、クロマトグラフ、およびスペクトルの結果に関するチェックも品質管理手続きに含まれます。MSD Productivity ChemStation ソフトウェアでは、こうしたチェックが自動的に行われ、オートサンプラ注入でのシーケンスが自動的に実行されます。

4 つのアプリケーションモード

Enhanced、EnviroQuant、DrugQuant、AIG Agilent Productivity ChemStationは、Enhanced Quantitation モード(通常)、EnviroQuant モード、DrugQuant モード、および Aromatics In Gasoline (AIG) モードに構成することができます(日本では Enhanced Quantitation モードのみサポート)。これらの各モードでは、アプリケーション固有のエントリやレポートが追加されます。

中国語および日本語について

MSD Productivity ChemStation ソフトウェア、Enhanced モードについてのオンラインヘルプ、ハードウェアマニュアル、およびソフトウェアマニュアルについては、英語版だけでなく日本語版と簡体字中国語版もございます。

コンプライアンス

本ソフトウェアは、さまざまな応用についての生産性および法的要件を満たしています。薬物試験ラボでは、前回注入した分析結果に基づいて再注入を自動化するインテリジェントシーケンスを使用できます。製薬ラボでは、21 CFR Part 11 対応パッケージ (Agilent MSD Security Chem-Station, G1732AA ：英語版) および IQ/OQ サービスを追加して使用できます。環境ラボでは、DFTPP/BFB オートチューン、単一サンプルのQCレポート、および複数サンプルの QC レポートを作成できます。ひとつのソフトウェアで GC と GC/MS の両方をコントロールでき、ラボの作業簡素化およびコスト削減が可能です。

システム要件

MSD Productivity ChemStation では、LAN ベースの5973/5975 series MSD と6850/6890 GC がサポートされます。また、GPIB ベースの 5973A MSD と 6890A GC、さらに 7683 series ALS、および G1888 ネットワークヘッドスペースサンプラ (HSS) もサポートされます。

PC の最小要件は、Pentium· III 1.0 GHz 以上、RAM 128 MB、ハードディスク容量 20 GB、CD-ROM ドライブ、SVGA カラーモニター、AVI ファイル再生用にサウンドカードとスピーカーまたはヘッドホン、および Windows 対応マウスです。

サポートされるオペレーティングシステムは Windows XP® Professional SP2 です。

環境への応用

- DFTPP/BFB によるオートチューン
- 農薬および内分泌撹乱物質についての RTL スペクトルと RT データベース
- 多核芳香族炭化水素 (PAH) についての RTL スペクトルと RT データベース
- 揮発性有機化合物 (VOC) についての RTL スペクトルと RT データベース
- ポリ塩化ビフェニル (PCB) 同族体についての RTL スペクトルと RT データベース
- 仮同定された化合物、複数のサンプル、スパイク、その他 QC についてのレポートを含む USEPA CLP 書式レポート

食品への応用

- FAME についての RTL スペクトルとRT データベース
- 香料についての RTL スペクトルとRT データベース
- 農薬および内分泌撹乱物質についての RTL スペクトルとRTデータベース

依存性薬物および法科学への応用

- 法中毒薬物についての RTL スペクトルとRT データベース
- インテリジェントシーケンス石油化学への応用
- ASTM D5769-95 による改質ガソリン分析

医薬品への応用

- 濃度に基づく重み付きキャリブレーション
- 21 CFR Part 11 対応ソフトウェア (Agilent MSD Security ChemStation G1732AA) (オプション)
- IQ/OQ/PV サービス (オプション)

機器コントロール

- 最大で 4 台の機器をコントロール(MSD は最大で2 台)
- LAN 装置と GP-IB 装置の両方に接続可能
- EI、PCI、NCI オートチューンおよび DFTPP、BFB によるオートチューンで最大感度を実現
- サンプルリストは LIMS からダウンロードできます
- バーコード操作をサポート
- 分析前および分析後のマクロをシーケンスに組み込み可能

定性分析

- ピーク純度ソフトウェアにより、ピークの重なりを検出
- PBM 検索アルゴリズムをオプションの NIST 検索と併用可能
- オプションライブラリとしては、NIST05、Wiley 7th、PMW (薬物)、Stan (農薬) を使用できます
- 構造式ライブラリ (オプション)
- 農薬および内分泌撹乱物質についての RTL とスペクトルデータベース (オプション) 定量分析
- 2000 種類以上の化合物について定量可能
- 20 レベルまでのキャリブレーション
- GC 検出器用および MS データ用インテグレータ
- 直線、二次曲線、平均のレスポンスファクタ、および重み付け等の拡張検量線近似機能
- Quant エディタによってEIC、スペクトル、定量分析の結果を 1 画面に表示

自動セットアップ機能

- eMethod
- AutoSIM Setup
- AutoQuant Setup
- RTL

カスタマイズ

- 機器主要情報の画面モニター
- ドロップダウンメニューの項目
- インジェクタなどのアイテムについてのメンテナンス指示
- テキストとグラフィックを組み合わせたカスタムレポート
- マクロ言語によるプロセスの自動化ユーザー支援
- 英語版、日本語版、簡体字中国語版のオンラインヘルプとマニュアル
- メンテナンスに関するビデオ、マニュアル
- ウェブページ上でソフトウェアパッチを提供

オプションのソフトウェア

デコンボリューションレポート作成ソフトウェア (G1716AA) 対象化合物の分析アプリケーション。MSD Productivity ChemStation、NIST AMDIS_32、および NIST MS 検索プログラムのから得られた結果を 1 つのレポートにまとめます。

MSD 用ヘッドスペースソフトウェアコントロール (G2923AA) MSD Productivity ChemStation で使用されるヘッドスペースサンプラ（HSS）を統合的にソフトウェアコントロールします。

MSD セキュリティケミステーション (G1732AA) FDA 21 CFR Part 11 の規定に準拠しているラボにおけるデータ取り込み、データ処理、および GC/MS データのレポートに使用するセキュリティソフトウェアシステムです。

詳細情報

弊社の製品およびサービスに関する詳細情報は、www.agilent.com/chem/jp をご覧ください。

お問い合わせは： 0120-477-111
横河アナリティカルシステムズ株式会社
〒192-0033 東京都八王子市高倉町9-1

Pentium® は、Intel Corporation の米国における登録商標です。Windows® は、Microsoft Corporation の米国における登録商標です。

Agilent は、万一この資料に誤りが発見されたとしても、また、本資料の使用により付随的または間接的に損害が発生する事態が発生したとしても一切免責とさせていただきます。

本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

© Agilent Technologies, Inc. 2005

Printed inJapan
September 8, 2005
5989-3014JAJP

Agilent Technologies